

Title	多チャンネル近藤効果による非フェルミ流体状態と電気抵抗(強相関伝導系の物理 若手秋の学校,講義ノート)
Author(s)	鈴木, 俊哉
Citation	物性研究 (1998), 70(2): 272-282
Issue Date	1998-05-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/96347
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

多チャンネル近藤効果による非フェルミ流体状態と電気抵抗

東北大学大学院理学研究科物理学専攻 鈴木俊哉

1 はじめに

1990年代に入ってから、強相関 f 電子系 (希土類、アクチナイド系)[1] および d 電子系 (銅酸化物)[2] の中にフェルミ流体論では説明できない現象を示すものが発見され、注目されている。これらの性質は、高温超伝導物質の探索の過程で発見されたものが多いが、超伝導相ではなく正常相で非フェルミ流体的 (NFL) 異常を示す点が興味深い。これまでに NFL 異常が観測された物質の多くは、Ce や U イオンが非常に希薄な極限では異常が確認されていないため、サイト間効果によって発生する効果だと考えられている。これに対して、網塚らによって精力的に研究されている $\text{Th}_{1-x}\text{U}_x\text{Ru}_2\text{Si}_2$ や $\text{Y}_{1-x}\text{U}_x\text{Ru}_2\text{Si}_2$ は希薄系でありながら NFL 異常を示している点で非常に特徴的である [3]。本稿では、不純物系の NFL 異常を対象として、数値繰り込み群 (NRG) を用いた我々の研究を報告する。

NFL 的異常を示し得る一不純物模型としては、80 年に Nozières と Blandin が発表した 2 チャンネル近藤モデル (TCKM) がある [4]。現実の物理系が TCKM の NFL ケースにマップされ得る可能性は Cox によって初めて指摘された [5]。たとえば正方対称な結晶場中で、 f^2 を Γ_5 、 f^1 を Γ_7 のみに制限して Schrieffer-Wolff 変換すると、 Γ_7 と Γ_6 の伝導電子が全く同じ強度で局在電子と結合するモデルが得られる。

TCKM の NFL 的異常については、強相関 f 電子系の解釈以外にも量子ドット系のモデルとしての関心などから、Bethe Ansatz による厳密解 [6]、Conformal Field Theory (CFT) による解析などが多数ある [7]。これらの研究より、TCKM の帯磁率および比熱の γ 係数は低温領域で $-\ln T$ の発散をもち、電気抵抗は \sqrt{T} に比例することがわかっている。電気抵抗は交換相互作用 J が小さい場合には温度降下と共に増加し、 J が非常に大きい場合には減少する [8, 9]。後者の場合には帯磁率や γ 係数の対数発散は弱いものとなる。従って TCKM を用いて希薄ウラン系の NFL 異常を説明しようとする、 $\text{Th}_{1-x}\text{U}_x\text{Ru}_2\text{Si}_2$ や $\text{Y}_{1-x}\text{U}_x\text{Ru}_2\text{Si}_2$ は電気抵抗の減少を示すことから交換相互作用を非常に強くする必要があり、帯磁率や γ 係数の対数発散がはっきり観測されている事実を同時に説明することができない。我々はここで一旦現実的なモデルを離れて、電気抵抗の減少と熱力学量の発散を同時に示すモデルが存在するののかという問題を考えてみた [10]。

もう一つの問題は結晶場中の多電子占有アンダーソンモデルから NFL 的異常を示すモデルが自然に導出できるか? という点である。Cox が行なったマッピングでは SW 変換の際、 f^2 の結晶場基底状態として非 Kramers 二重項のみを用いており、常に NFL 的異常が生じる。原型となるアンダーソンモデルについては、弱相関の領域で局所フェルミ流体 (LFL) であるものは、強相関でも LFL 的固有値構造を持つであろうという山田・芳田の予想が的中した歴史がある。これが結晶場中の多電子占有アンダーソンモデルでも正しいと考えれば、NFL 的異常を導き出すために我々はどこかで非現実的な仮定を持ち込んでいると考えられる。その可能性が最も強いと思われるのが SW 変換で f^2 の結晶場状態を非 Kramers 二重項に限定したことである。この点について古賀・ス波が、 f^2 の結晶場励起状態を取り入れたモデルを NRG を用いて研究し、この f^2 の結晶場励起エネルギーが大きければ NFL 的状態が実現することを報告した [11]。さらに SW 変換を行わず、全ての結晶場状態を考慮したアンダーソンモデルであっても、NFL 的基底状態が存

在することもNRGによる計算の結果判明した[12]。こうして実現されたNFL的状态で、はたして電気抵抗の減少が起き得るかどうか最も興味ある問題だが、我々は f^2 - f^3 の価数揺動領域で起き得ると予想する。

2 拡張2チャンネルアンダーソンモデルの示す物性

まず、我々が考えた電気抵抗の減少と帯磁率の発散を同時に示すモデルが示す物性について述べる。拡張2チャンネルアンダーソンモデルは、次のような形をしている。

$$H = H_c + H_{c-f} + H_f, \quad (1)$$

$$H_f = \sum_{m=(0,\pm 1), \alpha=\pm 1} \varepsilon_{fm} n_{m\alpha} \quad (2)$$

$$+ \frac{U}{2} \sum_{((m=\pm 1)\alpha) \neq ((m'=\pm 1)\alpha')} n_{m\alpha} n_{m'\alpha'} \quad (3)$$

$$+ J \sum_{(m=\pm 1)\{\alpha\}} \vec{\sigma}_{\alpha_1\alpha'_1} \vec{\sigma}_{\alpha_2\alpha'_2} f_{m\alpha_1}^\dagger f_{m\alpha'_1} f_{0\alpha_2}^\dagger f_{0\alpha'_2}, \quad (4)$$

$$H_{c-f} = \sum_k \sum_{(m=\pm 1)\alpha} V(f_{m\alpha}^\dagger c_{km\alpha} + h.c.), \quad (5)$$

$$H_c = \sum_k \sum_{(m=\pm 1)\alpha} \varepsilon_k c_{km\alpha}^\dagger c_{km\alpha}. \quad (6)$$

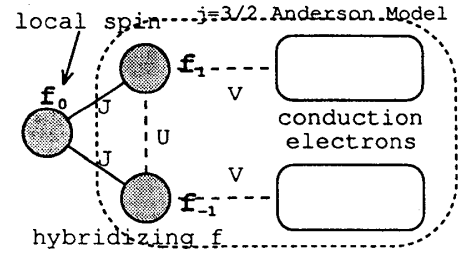


図1: 拡張2チャンネルアンダーソンモデルの模式図

$f_{m\alpha}(c_{km\alpha})$ は対称性 m の f 軌道中の、スピン α を持った電子に対する消滅演算子 (同様に波数 k の伝導電子のそれ) である。 ε_f, U はそれぞれ軌道 $f_{\pm 1}$ のポテンシャルエネルギーとクーロン相互作用、 J は f_0 と $f_{\pm 1}$ の間に働く交換相互作用である。このモデルは通常の四重縮退アンダーソンモデル ($j = 3/2$) に局在スピン f_0 を一個取りつけた形をしており (図1)、交換相互作用項 (4) を無視すれば通常のアンダーソンモデルと同様の近藤効果を示す。つまり、高エネルギー領域では、エネルギー降下と共に系はいったん通常のアンダーソンモデル型の強結合固定点へ変化していく。この過程で散乱強度はユニタリ極限に向かって増加する。 J 以下のエネルギー領域になると交換相互作用の効果が現れ、2チャンネル近藤モデル型の、オーバースクリーニングが生じる。これによって強結合固定点は不安定になり、系の固有値構造は中間結合固定点に移る。中間結合固定点では散乱強度はユニタリ極限のちょうど半分になる。このようにして、系が強結合から中間結合の固定点に変化する過程で、電気抵抗は最大50%減少する。

この変化はNRGによって計算される固有値構造のフローチャート (図2) で確認することができる。NRGの計算手法の詳細は参考文献[13]に譲り、本稿で示す結果の理解に必要な部分の説明にとどめる。運動量表示でみたハミルトニアンは無数の伝導電子が同等に局在軌道と混成するが、NRGでは局在軌道と混成するただ一つの波動関数をもとにWannier関数で表示し、伝導バンドを一次元の鎖上のハミルトニアンに変形し、逐次対角化が可能な形式にする。さらに、対数離散化 (低エネルギー状態をより正確に扱うことを目的としてフェルミ面近傍をより細かくサンプリングする方法) を行なうと、逐次対角化の過程でハミルトニアンが自己相似性を保つようになる。この結果、ハミルトニアンは以下のように近似される。

$$H = \lim_{L \rightarrow \infty} H_L, \quad (7)$$

$$H_L = H_f + \sum_{m=\pm 1} \left(\sqrt{A_\Lambda} V f_m^\dagger s_{0m} + h.c. \right) + H_L^0, \quad (8)$$

$$H_L^0 = \sum_{l=0}^{L-1} \sum_{m=\pm 1} t_l (s_{l+1,m}^\dagger s_{l,m} + h.c.), \quad (9)$$

伝導電子のシェル $s_{l,m}$ を付け加えながら逐次対角化をすすめていくと、固有状態の増加に伴って行列が巨大化し、やがて計算機能力を越えてしまう。我々は各ステップで低エネルギーの固有状態を 900 個程度残して対角化をすすめる。ステップ L でシェルを付け加えることによる摂動の大きさは $t_L \sim \Lambda^{-(L-1)/2}$ 程度であるので、これより高い励起エネルギーの準位を捨てた影響は低エネルギーの状態についてはあまり大きくない。また、対数離散化による自己相似性のため、固定点では t_L でスケールした固有値構造は L に依存しない構造となる。本節の計算では $\Lambda = 3$ を用いた。

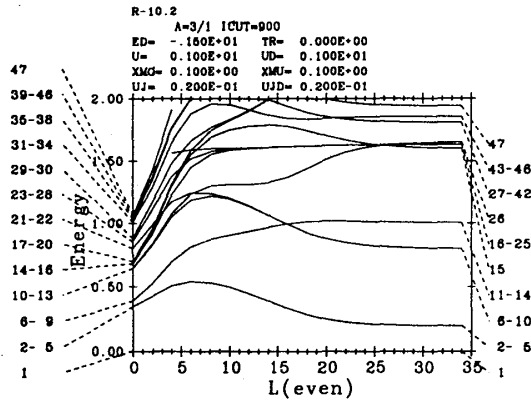


図 2: NRG で計算した拡張 2 チャンネルアンダーソンモデルの固有値構造のフローチャート。ハミルトニアンのパラメータはバンド幅 D を単位として $\epsilon_f = -1.5$, $U = 1.0$, $V^2/2D = 0.1$, $J = 0.02$ である。両端での数字は $L = 0$ および $L = 34$ で、エネルギー順に並べた固有状態の番号である。(2-5 と表記されているものは 2,3,4,5 の 4 つの固有状態が同じエネルギーを持っていることを示す)

index	NRG					CFT
	E	Q	j	j_c	$r^* E$	$\frac{E_c I}{\pi v_F}$
1	0	0	1/2	0	0	0
2-5	0.200	± 1	0	1/2	0.125	1/8
6-8	0.800	0	1/2	1	0.500	1/2
9,10	0.800	± 2	1/2	0	0.500	1/2
11-14	1.004	± 1	1	1/2	0.629	5/8
15	1.598	0	3/2	0	1.000	(1)
16-18, 25	1.631	0	1/2	3/2	1.021	1
19-24	1.631	± 2	1/2	1	1.021	1
26	1.651	0	1/2	0	1.033	(1)
27-38	1.809	± 1	0	3	1.132	9/8
39-42	1.809	± 3	0	1/2	1.132	9/8

表 1: NRG で得られた低エネルギー領域の固有値構造 ($L = 34$) と CFT の有限サイズスペクトルの比較。NRG の index は図 2 の右端のものと同じである。電荷 Q は、half-filled の電子数を 0 とした数である。比例係数 $r^* = 0.6260$ は NRG で得られたエネルギーのうち第一励起エネルギーが CFT のそれと等しくなるようにとった。 $\frac{E_c I}{\pi v_F}$ の値に括弧が施されているものは、多粒子励起のため CFT の理論値が式 (7) では表わされない値である。

図 2 を見ると、 $L = 0 \sim 6$ の領域では、系は $j = 3/2$ の四重縮退アンダーソンモデルが $s = 1/2$ の局在スピンと弱く結合している領域であり、その固有値構造は 1 チャンネルアンダーソンモデルの一粒子励起状態 ($i = 2 \sim 5$) や二粒子励起状態 ($i = 10 \sim 30$) が局在スピンとの相互作用で分裂しているという描像で把握できる。さらに繰り込みをすすめて系の低エネルギー領域構造を見ると、準粒子の励起エネルギーより交換相互作用によるエネルギーの利得が大きくなり ($L > 16$)、高エネルギー領域で可能であった LFL に交換相互作用を摂動的に加えた描像では把握できなくなる。低エネルギーの極限では、固有値構造が NRG ステップの偶奇に寄らない TCKM の NFL 特有の構造になる。CFT の有限サイズスペクトル解析によれば、中間結合固定点での TCKM の固有値構造は、電荷

(Q)、スピン (j)、チャンネル自由度 (j_c) の関数として

$$E(Q, j, j_c) = \frac{v_F}{l} \left\{ \frac{(Q + \delta)^2}{8} + \frac{j(j+1)}{4} + \frac{j_c(j_c+1)}{4} \right\} \quad (10)$$

と書ける。 l は系のサイズを表わすパラメータであり、中間結合固定点では準粒子励起と交換相互作用の二つの自由度がこの一つの量 l だけで決定されてしまう点が特徴的である。 δ はポテンシャル散乱で、電子正孔非対称な系では有限の値になる。NRG によって数値的に得られた固有値を式 (10) によって導いたものと比較した結果を表 1 に示す。各固有状態の電荷、スピン、チャンネル自由度から式 (10) を用いて計算した固有値との誤差は 3% の範囲に収まっており、TCKM の NFL 的固定点と同じものが得られていることがわかる。偶数ステップのフローチャートに注目した時、この NFL の中間結合固定点へ近づく過程で、第一励起エネルギーが小さくなっていくのは電気抵抗が減少する場合に特有のものである。TCKM や拡張 2 チャンネルアンダーソンモデルで電気抵抗が増加していく場合には、通常のアンドーソンモデル的な固有値構造を示す領域は表われず、第一励起エネルギーは単調に増加する。

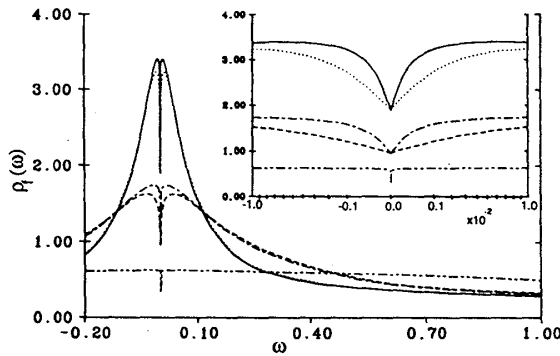


図 3: 拡張 2 チャンネルアンダーソンモデルの一粒子励起スペクトル。ハミルトニアンのパラメータは実線 ($U = 1.0$, $J = 0.0075$, $V^2/2D = 0.05$, $\rho_s(0) = 1.02 \times 10^3$), 点線 (1.0, 0.01, 0.05, 119), 一点鎖線 (1.0, 0.02, 0.1, 625), 破線 (1.0, 0.03, 0.1, 29.7), 二点鎖線 (0.1, 0.04, 0.3, 2.50×10^7) である。

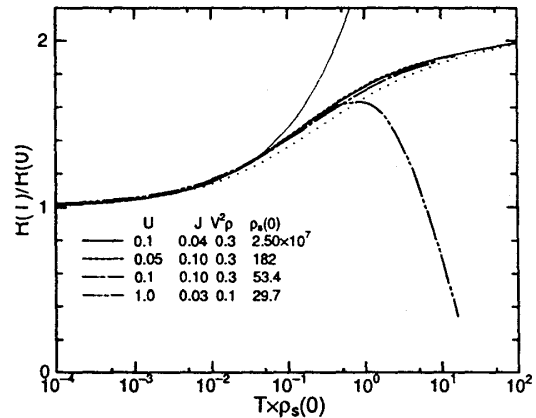


図 4: 拡張 2 チャンネルアンダーソンモデルの電気抵抗。電気抵抗の値は絶対零度極限値で規格化し、温度の単位として磁気励起スペクトルの $\omega \rightarrow 0$ 極限値の逆数 $1/\rho_s(0)$ を用いた。各曲線のハミルトニアンのパラメータは図中に示してある。細線は電気抵抗が $T^{1/2}$ に比例する領域を確認するため、 $R(T) = R(0) - c_R T^{1/2}$ を低温で計算値と一致するようにひいたものである。

さて、数値的に計算された散乱強度 (一粒子励起スペクトル) と電気抵抗の計算結果を図 3, 4 に示す。一粒子励起スペクトルの高エネルギーでの構造には通常のアンドーソンモデルのいわゆる近藤共鳴が存在するが、フェルミ面のごく近傍に鋭い構造の特異点が存在し CFT によって予言されたような $\sqrt{\omega}$ に比例した構造が見られる。電気抵抗はこれを反

映して低温極限では \sqrt{T} に比例するが、それより高温側には $\log T$ に比例した領域がある。

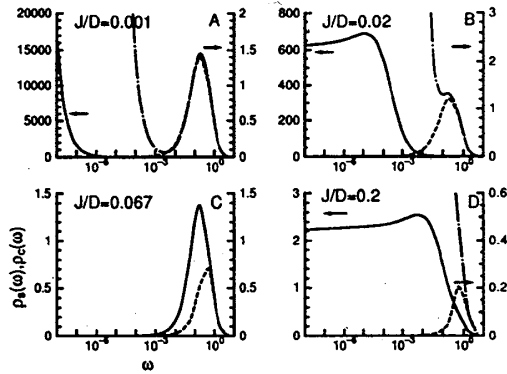


図 5: 拡張 2 チャンネルアンダーソンモデルの磁気励起スペクトル(実線、一点鎖線)と、チャンネル励起スペクトル(破線)。A,B,C,D の順に交換相互作用を増してあり、電気抵抗は温度と共に減少するモデル(A,B)から増加するモデル(D)に移行する。交換相互作用以外のパラメータは図 2 と同じである。

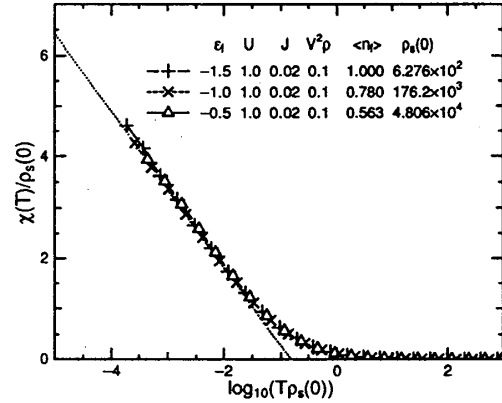


図 6: $\rho_s(0)$ でスケールした拡張 2 チャンネルアンダーソンモデルの帯磁率。各記号に対応するハミルトニアンのパラメータは図中に記してある。(+ 記号で示されているのが図 5B と同じものである。)

このアンダーソンモデル的な領域から TCKM 的な領域に移る過程は磁気励起スペクトルのエネルギー依存性でも確認できる。本稿での磁気励起スペクトル $\rho_s(\omega)$ とは系のスピン演算子 $s_f^z = \sum_{m=0,\pm 1} s_{fm}^z$ の帯磁率の虚部、チャンネル励起スペクトル $\rho_c(\omega)$ とは演算子 $n_f^c = \sum_{m=\pm 1, \alpha=\pm 1} m n_{f m \alpha}$ の帯磁率の虚部として定義している。磁気励起スペクトルの高エネルギー領域($\omega \gg J$)には四重縮退アンダーソンモデルの磁気励起と同様のピークが存在し、強結合固定点に近づくにつれて励起強度は ω に比例し減少する。この温度領域ではチャンネル自由度とスピン自由度は同等であり、チャンネル励起にも全く同じピークが表われる。通常アンダーソンモデル的な領域と、TCKM 的領域が最も良く分離されている図 5A では、 $\omega > 10^{-3}$ の領域でスピン励起(一点鎖線)とチャンネル励起(破線)は全く同じ曲線を描いている。さらに低エネルギーの 2 チャンネル近藤効果(TCKE)が支配的な領域では磁気励起強度は急激に増大し、中間結合固定点のごく近傍で $\chi''(\omega)$ は一定値をとる。図 5B では $\omega < 10^{-6}$ の領域でスピン励起(実線)はほぼ一定値をとっている。この特徴は図 6 に示した帯磁率に $-\ln T$ の発散が存在することと符合する。(図 5A の固定点は非常に低エネルギー側に位置しているため、そこまでの範囲を示していない。) 拡張 2 チャンネルアンダーソンモデルは電気抵抗が減少する場合非常に大きい磁気励起の発散がみられるので(図 5A,B)、電気抵抗の減少と同時に帯磁率の $-\ln T$ 発散を示すモデルである。

ところで、TCKM や拡張 2 チャンネルアンダーソンモデルは、そのままでは絶対零度でも残留エントロピーを持つモデルである。重い電子系の NFL 的性質を多チャンネル近藤効果で説明しようとする試みに対しては、ごく低温で残留エントロピーを解放する別の現象を挿入する必要があるが不自然なモデルだという指摘がしばしば為される。しか

し、交換相互作用や混成強度に僅かな異方性を導入すると、この異方性が有効となるような低温では局在スピンは一方の相互作用が優勢なチャンネルの伝導電子によって完全にスクリーニングされ、もう一方のチャンネルは自由系として振舞うような LFL 的な系に到達すると予想される。実際に交換相互作用に 1/100 程度の異方性を加えて計算を行うと、既に述べたのと全く同じ NFL 的性質を示す温度領域を通過してから LFL に戻ることがわかった (図 7)。

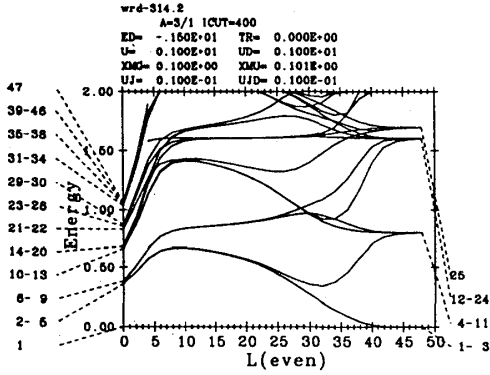


図 7: 混成強度に異方性のある拡張 2 チャンネルアンダーソンモデルの固有値構造のフローチャート。ハミルトニアンのパラメータは $\varepsilon_f = 1.5$, $U = 1.0$, $V_1^2/2D = 0.1$, $V_{-1}^2/2D = 0.101$, $J = 0.01$ である。

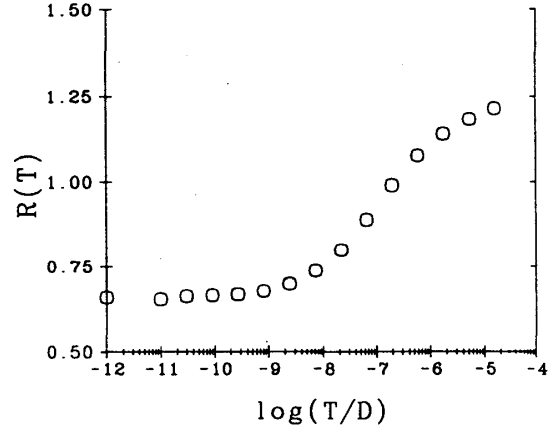


図 8: 図 6 の混成強度に異方性のある拡張 2 チャンネルアンダーソンモデルの電気抵抗。

このようなモデルに対して両チャンネルの散乱強度を平均して計算した電気抵抗は、NFL 的溫度領域で異方性の無いモデルと同様に電気抵抗の減少を示す (図 8)。以上の結果から、我々は TCKM の残留エントロピーの問題については必ずしも TCKM の枠組を逸脱せずに説明することも可能であると考えている。

3 結晶場中 6 重縮退アンダーソンモデルの示す物性

さて、現実的なモデルとして $j = 5/2$ のアンダーソンモデルにフント結合をとり入れ、結晶場中においた場合の計算結果を見てみよう。このモデルのハミルトニアンは次のように置いた。

$$H = H_c + H_{c-f} + H_f, \quad (11)$$

$$H_f = \sum_{\Gamma\gamma} \varepsilon_{\Gamma} n_{f\Gamma\gamma} + \frac{U}{2} \sum_{(\Gamma\gamma) \neq (\Gamma'\gamma')} n_{f\Gamma\gamma} n_{f\Gamma'\gamma'} \quad (12)$$

$$- \frac{I}{49} \sum_{\{\Gamma\gamma\}} j_{f\Gamma\gamma\Gamma'\gamma'} j_{f\Gamma''\gamma''\Gamma'''\gamma'''} f_{f\Gamma\gamma}^\dagger f_{f\Gamma'\gamma'} f_{f\Gamma''\gamma''}^\dagger f_{f\Gamma'''\gamma'''} - \frac{35n_f}{4}, \quad (13)$$

$$H_{c-f} = \sum_k \sum_{\Gamma\gamma} V(f_{\Gamma\gamma}^\dagger c_{k\Gamma\gamma} + h.c.), \quad (14)$$

$$H_c = \sum_k \sum_{\Gamma\gamma} \varepsilon_k c_{k\Gamma\gamma}^\dagger c_{k\Gamma\gamma}. \quad (15)$$

ここで $f_{\Gamma\gamma}(c_{k\Gamma\gamma})$ は Γ 既約表現の γ 成分の f 電子の消滅演算子 (同様に波数 k の伝導電子のそれ) である。 $\varepsilon(\Gamma)$, U , I はそれぞれ f 軌道のポテンシャルエネルギー、クーロン相互作用、フント結合を表わす。このモデルはチャンネル数の多さと、結晶場をとり入れたために計算量が増大し、前節のパラメータ ($\Lambda = 3$, 各ステップの固有値を 900 個残す) では計算機能力を越えてしまう。本節では各ステップで固有状態 300 個を残して計算し、少ない状態数で低エネルギーの固有値構造を維持するために $\Lambda = 8$ と大きくとっている。

本稿では結晶場として正方対称なものをとった。この結晶場中では、 $j = 5/2$ の一電子軌道は 3 つの二重項 $\Gamma_7^{(1)}$, Γ_6 , $\Gamma_7^{(2)}$ に分裂する。 (Γ_6 , $\Gamma_7^{(1)}$ の二つは立方対称結晶場中では Γ_8 四重項に縮退していたものである。)

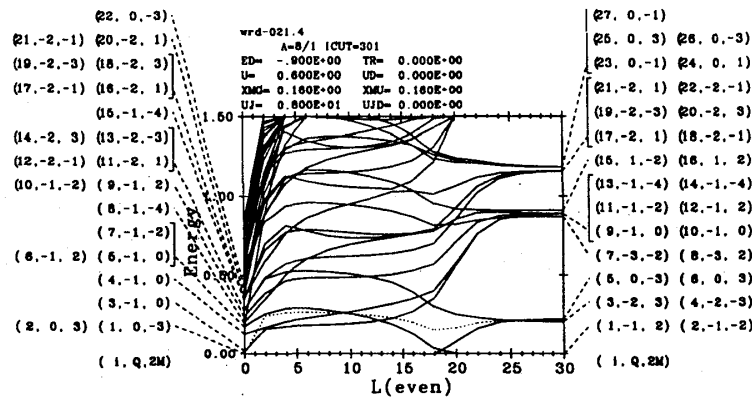
正方対称な結晶場中においたこのモデルを NRG により解析したところ、混成強度の大きさによって低温極限の固有値構造は NFL 的、結晶場一重項的、 f^0 的構造と移り変わることがわかった [12]。また、有限磁場の下で磁化の温度依存性を計算すると、NFL 的固有値構造を持つものの磁化率には $-\ln T$ 的な振舞がみられた。さらに NFL 的固有値構造を解析すると、CFT で得られるような TCKM 的固有値構造に、これと独立な LFL 的構造を 1 チャンネル分加えた構造になっている [14]。もとのアンダーソンモデルの 3 種類の伝導電子のうち、一つを人工的に取り除いたものと比較すると、その LFL 的な成分は f^1 結晶場状態の中で最もエネルギーの高い軌道と混成する伝導電子チャンネルに由来し、このチャンネルを取り除いても NFL 的固有値構造は全く同じものが得られることがわかった。

ここで強調しておかなければならないことは、弱相関 ($V \gg U, I$) の領域では実際に LFL 的固有値構造をもつモデルから NFL 的固有値構造を導き出すのに必要なパラメータを強相関 ($U, I \gg V$) にすることだけだった、という点である。

本稿では、ウラン系の基底状態として f^2 の結晶場固有状態のうち Γ_5 対称性の非 Kramers 二重項をとり、 f^1 - f^2 の間で価数揺動を行うものと、 f^2 - f^3 の間で価数揺動を行うものの二つについて先の拡張 2 チャンネルアンダーソンモデルのフローチャートと比較して電気抵抗が減少する可能性を考察する。さらに簡単化するため、以下では、3 つの伝導電子チャンネルのうち、最もエネルギーの低い f^1 結晶場状態と混成するものをあらかじめ取り除いたモデルでの計算結果を示している。(この強制的に 2 チャンネルへの単純化を行なったモデルでも混成強度を変化させると NFL 的、結晶場一重項的、 f^0 的構造の間を変化する。) 本稿では示さないが、このチャンネルに由来する固有値は、偶数ステップでフェルミ面のごく近傍の励起状態として表われ、繰り込みを進めるにつれて励起エネルギーが小さくなる。つまり f 軌道との相関は弱くなる。この軌道からの分は温度降下の際の電気抵抗の減少としてあらわれることが期待される。

まず f^1 - f^2 が主要配位となるようなモデルとして、結晶場によって 3 つの二重項に分裂した f^1 に対し $\varepsilon(\Gamma_7^{(1)}) = -0.9$, $\varepsilon(\Gamma_6) = -0.75$, $\varepsilon(\Gamma_7^{(2)}) = -0.5$ と与えた。 ($\Gamma_7^{(1)}$ 対称性の伝導電子チャンネルは無視される。) さらに、 f 軌道内部での相互作用としてクーロン反発 $U = 0.6$ とフント結合 $I = 8.0$ を加える。混成強度は $V^2/2D = 0.16$ とした。この時、 f^2 の固有状態のうち Γ_5 の対称性をもつ非 Kramers 二重項が f 軌道の基底状態となる。

固有値構造フローチャートを図 9 に、低温での固有値構造と CFT の比較を表 2 に示した。TCKM や拡張 2 チャンネルアンダーソンモデルとは異なり、結晶場中の固有状態は

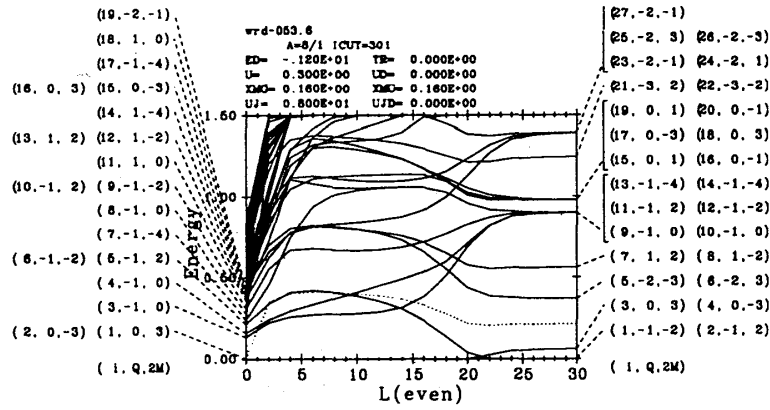
図 9: f^1 - f^2 が主要配位となる場合の固有値構造のフローチャート

球対称なスピンの固有状態になっていないので、NRGによって得られた量子数を式(10)に代入して比較することはできない。そこで、TCKMの固有値構造を示すようなコンフォーマルタワーを考え、この自由度として、有効交換相互作用(r^*)とポテンシャル(δ)をとることで比較した。この2つのパラメータは第一・第二励起エネルギーから決定する。比較の結果、各状態の縮重度、基底状態からの電荷のずれはTCKMのコンフォーマルタワーと完全に一致し、エネルギー固有値もほぼ一致する。固有値のずれについては、この計算では $\Lambda = 8$ と対数離散化のパラメータを大きくとっており、高エネルギーの励起では有限サイズ問題とは数値的なずれが生じたためと考えられる。

NRG				CFT			
index	$Q - Q_0$	E	r^*E	Q	j	j_c	$\frac{E_c L}{\pi v_F}$
1-2	0	0.000	0.000	0	1/2	0	0
3-4	-1	0.203	0.120	-1	0	1/2	0.120
5-6	1	0.219	0.130	1	0	1/2	0.130
7-8	-2	0.871	0.516	-2	1/2	0	0.491
9-14	0	0.889~0.891	0.527~0.528	0	1/2	1	0.500
15-16	2	0.909	0.539	2	1/2	0	0.509
17-22	-1	1.158~0.160	0.687~0.688	-1	1	1/2	0.620
23-28	1	1.184	0.702	1	1	1/2	0.630

表 2: 図 8 の NRG によって得られた低温極限 ($L = 30$) の固定点構造と CFT の有限サイズスペクトルの比較。 $Q - Q_0$ は基底状態からの電荷のずれを示す (half-filled からのずれではない)。第一、第二励起状態から見積もられた有効交換相互作用とポテンシャル散乱は $r^* = 0.593$, $\delta = 0.018$ である。

NFL 的固有値構造の主要パラメータである有効交換相互作用 (中間結合固定点において、スピンの生き残っていることによるエネルギーの利得) の変化は第一励起エネルギー ($f^2 \rightarrow f^1$) と第二励起エネルギー ($f^2 \rightarrow f^3$) の平均から見積ることができる。この量は図 9 中に点線で示してある。有効交換相互作用は、基底状態が f^3 から f^2 に移りかわるエ

図 10: f^2 - f^3 が主要配位となる場合の固有値構造のフローチャート

エネルギーの近傍でいったん減少するが大きな変化は示さず ($L \sim 18$)、TCKE による電気抵抗の減少はあまり期待できない。

次に f^2 - f^3 が主要配位となるようなモデルとして $U = 0.3$ 、 $\varepsilon(\Gamma_7^{(1)}) = -1.2$ 、 $\varepsilon(\Gamma_6) = -1.05$ 、 $\varepsilon(\Gamma_7^{(2)}) = -0.8$ と与えた。フロント結合と混成強度は f^1 - f^2 の場合と同じとした。

index	NRG			CFT			
	$Q - Q_0$	E	r^*E	Q	j	j_c	$\frac{EcI}{\pi v_F}$
1-2	0	0.000	0.000	0	1/2	0	0.000
3-4	1	0.058	0.034	1	0	1/2	0.034
5-6	-1	0.369	0.216	-1	0	1/2	0.216
7-8	2	0.559	0.328	2	1/2	0	0.319
9-14	0	0.896~0.900	0.525~0.527	0	1/2	1	0.500
15-20	1	0.978~0.980	0.573~0.574	1	1	1/2	0.534
21-22	-2	1.244	0.728	-2	1/2	0	0.682
23-28	-1	1.389~1.393	0.813~0.815	-1	1	1/2	0.716

表 3: 図 9 の NRG によって得られた低温極限 ($L = 30$) の固定点構造と CFT の有限サイズスペクトルの比較。第一、第二励起状態から見積もられた有効交換相互作用とポテンシャル散乱は $r^* = 0.585\delta = -0.364$ である。

f^2 - f^3 が主要配位であるモデルでは、 f^3 基底であるエネルギー領域で有効交換相互作用がゆるやかに減少し、 f^2 基底状態が成立してからはほとんど増加しない。この変化は TCKM や拡張 2 チャンネルアンダーソンモデルが TCKE で電気抵抗が減少する場合と類似している。

以上を示した結果は、どちらも NFL が実現する混成強度としてはかなり大きく、結晶場一重項への転移が起きる強度に近い。混成強度が小さい場合には、 f^2 - f^3 の基底状態入れ換わりは起きず、有効交換相互作用は単調増加するので電気抵抗の増加として寄与することが予想される。

4 今後の課題

4.1 ポテンシャル散乱の温度依存性の考慮

第3節で扱った結晶場中の6重縮退アンダーソンモデルは伝導電子のチャンネル数の多さのために、直接動的励起を計算することは現段階では不可能である。そこで、本稿では固有値構造のみを計算し、有効交換相互作用の温度依存性を動的励起が実際に計算されたモデルのそれと比較して電気抵抗の温度変化を予想し、 f^2 - f^3 を主要配位とするモデルで有望であるとした。しかし結晶場中6重縮退アンダーソンモデルの場合、ポテンシャル散乱の強度が有効交換相互作用と同程度の強いエネルギー依存性を持っており、有効交換相互作用だけで電気抵抗の温度依存性が評価できるのかはわからない。このポテンシャル散乱の強いエネルギー依存性は、高温ではhalf-filledの f^3 状態を基底状態としていた系が低温で f^2 の非Kramers二重項を基底基底とするNFLに転移するためと考えられる。拡張2チャンネルアンダーソンモデルやポテンシャル散乱つきTCKM[9]では、ポテンシャル散乱の強度のエネルギー依存性はほとんどないので、対応づけが困難である。正確な評価を行うためには、くりこみの過程で中間結合固定点に到達する前に得られる固有値構造を記述するような有効ハミルトニアン の考案が必要である。

4.2 拡張2チャンネルアンダーソンモデルの現実性

本稿では、拡張2チャンネルアンダーソンモデルは単に「電気抵抗の減少と帯磁率の発散を同時に示すモデル」として紹介し、現実の系との関係については述べなかった。このモデルを敢えて現実の系にマップしようとする、立方対称結晶場中のアンダーソンモデルの Γ_7 軌道に f 電子が一個局在し、 Γ_8 軌道の f 電子が伝導電子と混成しているというものになるが、このようなモデルが6重縮退アンダーソンモデルの一つの極限として存在し得るであろうか？本稿で示したような混成強度やクーロン相互作用が等方的なモデルでは不可能であるが、現在これらの量に異方性をとり入れた場合について研究中である。

参考文献

- [1] M. B. Maple *et al.* : J. Low. Temp. Phys. **95** (1994) 225.
- [2] B. Batlogg : Physica B **169** (1990) 7.
- [3] H. Amitsuka and T. Sakakibara : J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994) 736 ; T. Sakakibara, H. Amitsuka, D. Sugimoto, H. Mitamura and K. Matsuhira : Physica B **186-188** (1993) 317 ; H. Amitsuka, T. Hidano, T. Honma, H. Mitamura and T. Sakakibara : Physica B **186-188** (1993) 337.
- [4] P. Nozières and A. Blandin : J. Phys. (Paris) **41** (1980) 193.
- [5] D. L. Cox : Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 1240, Physica B **186-188** (1993) 312.
- [6] P. D. Sacramento and P. Schlottmann : Phys. Rev. B **43** (1990) 295 ; P. B. Wiegmann and A. M. Tsvelick : Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **38** (1983) 489.
- [7] I. Affleck, A. W. W. Ludwig, H. B. Pang and D. L. Cox : Phys. Rev. B **45** (1992) 7918 ; I. Affleck and A. W. W. Ludwig : Nucl. Phys. B **352** (1991) 849 ; **360** (1991) 641.
- [8] O. Sakai, Y. Shimizu and N. Kaneko : Physica B **186-188** (1993) 322.

- [9] H. Kusunose, K. Miyake, Y. Shimizu and O. Sakai : Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 271, H. Kusunose, Dr. Thesis, Department of Material Physics, Osaka University, Toyonaka (1997)
- [10] O. Sakai, S. Suzuki, Y. Shimizu, H. Kusunose and K. Miyake : Solid State Commun. **99** (1996) 461, S. Suzuki, O. Sakai and Y. Shimizu : Solid State Commun. (印刷中 Cond-Mat/9706241).
- [11] M. Koga and H. Shiba : J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 4345 ; M. Koga and H. Shiba : J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 3007.
- [12] O. Sakai, S. Suzuki and Y. Shimizu : Solid State Commun. **101** (1997) 791.
- [13] NRG そのものに関しては
H. R. Kurishna-Murthy, J. W. Wilkins and K. G. Wilson : Phys. Rev. B. **21** (1980) 1003.
NRG を用いた輸送係数の計算に関しては
S. Suzuki, O. Sakai and Y. Shimizu : J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 4034.
- [14] Y. Shimizu, O. Sakai and S. Suzuki : to be published in J. Magn. Magn. Matter (Proceedings of ICM '97), J. Phys. Soc. Jpn. (投稿準備中)